

УДК 538.958, 538.915

## Електронний, дірковий та екситонний енергетичний спектр двошарової квантової точки еліпсоїдальної форми

Бойчук В. І., Гольський В. Б.

fizyka.drohobych.net

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

В роботі розвинуто теорію дослідження енергетичного спектру квазічастинки для складної двошарової квантової точки (КТ) еліпсоїдальної форми. Знайдено вигляд хвильової функції частинки. Проаналізовано залежність енергії дірки від об'єму внутрішнього та зовнішнього шару КТ. Обчислено енергію зв'язку екситона основного стану в даній гетероструктурі.

## Вступ

В останні десятиліття у фізиці твердого тіла основна увага приділяється дослідженню наноструктур. Особливе місце відводиться вивченню властивостей гетероструктур з квантовими точками, які характеризуються дискретним спектром [1-2]. Оскільки їхні розміри десятки нанометрів, то важко стверджувати про конкретну форму нанокристала. Загальним випадком є еліпсоїдальна форма, яка за певних параметрів може наближатися до сфери чи диску. В роботі [3] методом тунельної мікроскопії показано, що для структури *InAs/GaAs* форма квантових точок близька до еліпсоїдальної. зазначене вище зумовило інтерес теоретиків до дослідження властивостей таких КТ [4-9].

В наближенні нескінченної потенціальної ями, знайдено енергетичний спектр зарядженої частинки та екситона, досліджено вплив поляризаційних ефектів на спектр квазічастинки [4-7]. Ці розрахунки можуть бути використані для КТ великого об'єму, або коли розрив зон на межі середовищ досить великий. У роботах [8-9] досліджувались КТ еліпсоїдальної форми з врахуванням реально-го розриву зон на межі середовищ. Показано неможливість зшивання хвильових функцій частинки, які є розв'язком рівняння Шредінгера в сфероїдальних координатах [8]. Для знаходження енергетичних рівнів було усереднено гамільтоніан. В [9] розвинуто метод побудови квазісферичної системи координат, який дозволяє повне розділення змінних. Отримано розв'язки, що аналогічні для циліндричної КТ. Однак введення ортогональної квазісферичної системи справедливе лише для досить великої ступені сплюснутості (великого ексцентриситету).

Сучасні нанотехнології дозволяють отримувати багатошарові КТ [10-11], які досить детально вивчені теоретично [12-15]. Досліджено властивості електронного спектру в двоямній закритій сферичній квантовій точці [13]. Знайдено спектр і хвильові функції електронів та поляризаційних фонових. Визначено потенціальну енергію взаємодії зарядженої частинки з поляризаційними зарядами меж поділу, досліджено також вплив перехі-

дних шарів на електронний спектр [14]. У роботі [15] отримано явний вигляд потенціальної енергії взаємодії квазічастинки з межею поділу у простій сферичній квантовій точці. Вважалося, що на границі існує перехідний шар, в якому діелектрична проникність є неперервною функцією координати. З врахуванням одержаних формул, обчислено електронні, діркові та екситонні спектри наногетеросистеми *HgS/CdS*.

Враховуючи сказане вище, постає задача дослідження багатошарових КТ еліпсоїдальної форми. У роботі розвинуто теорію для визначення електронного, діркового та екситонного спектрів для двошарової еліпсоїдальної КТ довільного ступеня сплюснутості. Отримано залежності енергії зв'язаних станів частинки від об'єму КТ і ступеня анізотропії її форми. Обчислено енергію зв'язку екситона в залежності від величини внутрішнього та зовнішнього шару складної КТ.

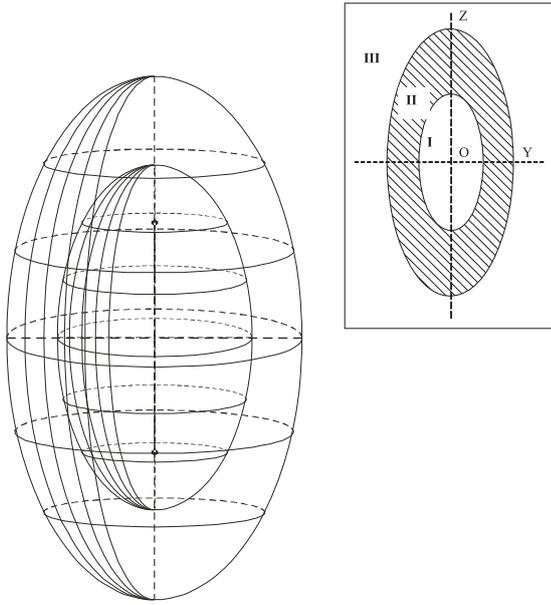
## Енергетичний спектр та хвильові функції електрона і дірки

Відомо, що дірковий спектр у центрі зони Брилюена характеризується трикратним виродженням, що відповідає зоні важких, легких дірок та спінівдщепленій зоні. Для знаходження діркових станів, як і для електронів, використаємо наближення параболічної зони. Тобто задача знаходження зв'язаних електронних і діркових станів буде різнитись тільки ефективною масою частинки. Розглядається двошаровий нанокристал з двома межами поділу у вигляді витягнутих сфероїдів (рис. 1.). Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера у витягнутих сфероїдальних координатах:

$$\hat{H}\Psi_{e,h}(\xi, \eta, \varphi) = E_{e,h}\Psi_{e,h}(\xi, \eta, \varphi), \quad (1)$$

де  $\Psi_{e,h}(\xi, \eta, \varphi)$ ,  $E_{e,h}$  – хвильова функція та енергія квазічастинки, а гамільтоніан частинки в сфероїдально-симетричному полі має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_{e,h}^*} \nabla + U(\xi, \eta, \varphi), \quad (2)$$



**Рис. 1.** Модель досліджуваного нанокристалу. На вставці — переріз нанокристалу в площині YOZ. Заштриховано область потенціальної ями.

де

$$U(\xi) = \begin{cases} \infty, \xi = \xi_1, \xi = \xi_2 \\ 0, \xi_1 \leq \xi \leq \xi_2 \end{cases} \quad (3)$$

$m_{e,h}^*$  — ефективна маса електрона, або дірки в нанокристалі,  $\xi = \xi_1, \xi = \xi_2$  — рівняння поверхонь внутрішнього і зовнішнього сфероїдів відповідно.

Рівняння (1) дозволяє розділення змінних. Знайдемо його розв'язок у вигляді добутку трьох функцій:

$$\Psi_{e,h}(\xi, \eta, \varphi) = R_{mn}(\xi) S_{mn}(\eta) \Phi_m(\varphi). \quad (4)$$

Провівши розділення змінних, отримаємо наступні три рівняння:

$$\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi_m(\varphi) + m^2 \Phi_m(\varphi) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S_{lm}(c, \eta) \right] + \left[ \lambda_{lm} - c^2 \eta^2 - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)} \right] S_{lm}(c, \eta) = 0, \quad (6)$$

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} R_{lm}(c, \xi) \right] - \left[ \lambda_{lm} - c^2 \xi^2 + \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)} \right] R_{lm}(c, \xi) = 0. \quad (7)$$

Розв'язавши диференціальні рівняння (5-7), маємо хвильову функцію частинки в двошаровій КТ у вигляді витягнутого сфероїда:

$$\Psi_{e,h}(\xi, \eta, \varphi) = S_{mn}^{(1)}(c, \eta) \cdot \left( B_1 R_{mn}^{(1)}(c, \xi) + B_2 R_{mn}^{(2)}(c, \xi) \right) e^{im\varphi}, \quad (8)$$

де

$$S_{mn}^{(1)}(c, \eta) = \sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) P_{m+r}^m(\eta),$$

$$R_{mn}^{(1)}(c, \xi) = \frac{1}{\sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} j_{m+r}(c\xi),$$

$$R_{mn}^{(2)}(c, \xi) = \frac{1}{\sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \sum_{r=0,1}^{\infty} 'd_r^{mn}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} n_{m+r}(c\xi),$$

$P_{m+r}^m(\eta)$  — поліноми Лежандра,  $j_{m+r}(c\xi)$ ,  $n_{m+r}(c\xi)$  — сферичні функції Бесселя та Неймана, а коефіцієнти  $d_r^{mn}(c)$  знаходяться з відповідних рекурентних формул [13].

Умова нормування для хвильової функції квазічастинки в досліджуваній гетероструктурі має наступний вигляд:

$$\frac{\pi d^3}{4} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \int_{-1}^1 (\xi^2 - \eta^2) \left| S_{mn}^{(1)}(c, \eta) \cdot \left( B_1 R_{mn}^{(1)}(c, \xi) + B_2 R_{mn}^{(2)}(c, \xi) \right) \right|^2 d\eta d\xi = 1. \quad (9)$$

Для знаходження енергетичного спектра електрона чи дірки у двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми в наближенні нескінченно гли-

бокої потенціальної ями потрібно використати на-

ступні умови:

$$\Psi_{e,h}(\xi_1, \eta, \varphi) = 0, \Psi_{e,h}(\xi_2, \eta, \varphi) = 0. \quad (10)$$

З умов (10) одержано дисперсійне рівняння:

$$\begin{vmatrix} R_{mn}^{(1)}(c, \xi_1) & R_{mn}^{(2)}(c, \xi_1) \\ R_{mn}^{(1)}(c, \xi_2) & R_{mn}^{(2)}(c, \xi_2) \end{vmatrix} = 0. \quad (11)$$

Розв'язавши його, можна визначити енергію дискретних станів частинки в досліджуваній гетеросистемі. Задача розв'язана в наближенні нескінченно глибокої потенціальної ями, тому обчислення проводились для структури *glass/CdSe/glass*, де розрив зон досить великий. Об'єм КТ обмеженої сфероїдальними поверхнями залежить від фокусної відстані  $d$  та параметрів  $\xi_1$  і  $\xi_2$  що визначають поверхні внутрішнього і зовнішнього сфероїдів. Розглядалися енергії  $E_{n_r, n, m}$  станів з квантовими числами  $n_r = 1$  (перший номер кореня рівняння (11)),  $n=0, 1, 2$  та  $m=-n, -n+1, \dots, n$ .

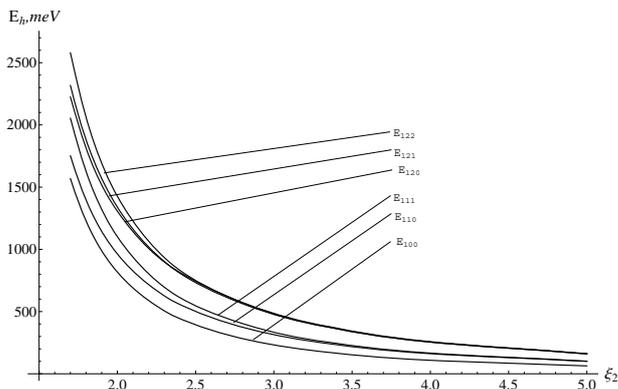


Рис.2. Залежність енергії дірки в двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми від  $\xi_2$  при  $\xi_1 = 1, 1$  та  $d = 48 \text{ \AA}$ .

Збільшення об'єму зовнішнього шару КТ можна досягти через зростання  $\xi_2$  (при фіксованих  $\xi_1$  та  $d$ ) та  $d$  (при фіксованих  $\xi_1$  та  $\xi_2$ ). В обох випадках збільшення об'єму веде до монотонного зменшення енергії всіх станів. Оскільки ефективна маса електрона ( $m_e^* = 0,13$ ) менша від маси дірки ( $m_h^* = 0,4$ ), енергія відповідних електронних станів більша від діркових. Різниця між цими станами спадає із збільшенням об'єму другого шару КТ. При  $\xi_2=3$  вона складає 480 меВ, а коли  $\xi_2=5$  – 131 меВ. На рис.2. наведено залежність енергії дірки в складній КТ при фокусній відстані  $d = 48 \text{ \AA}$  та параметру  $\xi_1 = 1, 1$ . Зміна параметру  $\xi_2$  веде до збільшення об'єму та зменшення коефіцієнта витягнутості сфероїда (відношення більшої півосі до меншої). У зв'язку із меншою симетрією сфероїда, ніж сфери, в сфероїдальних КТ відбувається розщеплення збуджених рівнів по квантовому числу  $m$ . Величина розщеплення зменшується із збільшенням  $\xi_2$ . Так  $E_e^{111} - E_e^{110}$  при  $\xi_2=2$  складає 426

меВ, а при  $\xi_2=4$  – 14 меВ. Діркові ж рівні розщеплюються значно слабше ( $E_h^{111} - E_h^{110}$  для аналогічних значень  $\xi_2$  складають відповідно 138 меВ та 5 меВ). Наступний збуджений рівень розщеплюється менше і при  $\xi_2=3,5$  різниця між енергіями дорівнює приблизно 1-2 меВ.

Збільшення  $\xi_1$  від 1,1 до 3,5 (рис. 3) веде до зменшення об'єму шару II та анізотропії форми внутрішньої області I КТ. Енергія квазічастинки будь-якого із досліджуваних станів зростає, що пояснюється зменшенням об'єму області II. Основний електронний стан при  $\xi_1=1,1$  дорівнює 195 меВ, а при  $\xi_1=3$  – 850 меВ. Для найнижчого діркового стану відповідні значення енергії мають значення 63 меВ та 276 меВ. Різниця між енергетичними рівнями із однаковими  $m$  збільшується, проте зменшується для станів із різними  $n$ . Різниця між електронними рівнями першого збудженого стану зростає від 5 меВ до 45 меВ, для діркових станів – від 1,5 меВ до 15 меВ. Збільшення фокусної відстані  $d$  при фіксованих  $\xi_1$  та  $\xi_2$  спричинює збільшення об'єму шару II КТ, що супроводжується пониженням енергії частинки для досліджуваних станів. Зменшується також різниця між енергетичними рівнями з однаковим  $n$ .

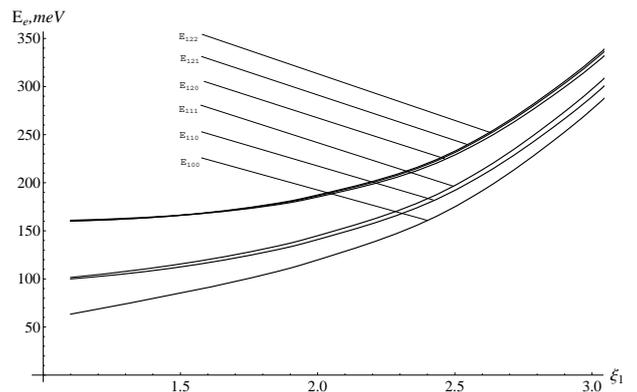


Рис.3. Залежність енергії електрона в двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми від  $\xi_1$  при  $\xi_2 = 5$  та  $d = 48 \text{ \AA}$ .

### Енергія зв'язку екситона

Для розглядуваної гетероструктури (рис 1.), гамільтоніан електрон-діркової системи буде мати вигляд:

$$\hat{H}_{ex} = \hat{H}_e + \hat{H}_h - \frac{e^2}{\varepsilon \cdot |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (12)$$

де  $\hat{H}_e$  та  $\hat{H}_h$  мають вигляд (2), а потенціальна енергія визначається формулою (3),  $m^*$  — ефективна маса частинки для відповідної області,  $\varepsilon$  — діелектрична проникність нанокристала.

Для розв'язку рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (12) хвильову функцію екситона вибрано у вигляді добутку:

$$\Psi_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_e(\mathbf{r}_e) \cdot \Psi_h(\mathbf{r}_h). \quad (13)$$

де  $\Psi_e(\mathbf{r}_e)$  та  $\Psi_h(\mathbf{r}_h)$  – відповідно хвильові функції електрона і дірки в розглядуваній гетеросистемі і мають вигляд (8).

Енергію екситона знаходимо після усереднення Гамільтоніана (12) по функціях (14):

$$E_{ex} = \int \Psi_{ex}^*(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \hat{H}_{ex} \Psi_{ex}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) d\tau \quad (14)$$

Враховуючи вигляд хвильової функції (14) та гамільтоніан (12), задача зводиться до обчислення інтегралу виду:

$$E = \int |\Psi_e|^2 \cdot |\Psi_h|^2 \cdot \frac{e^2}{\varepsilon \cdot |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\tau, \quad (15)$$

який визначає енергію зв'язку екситона.

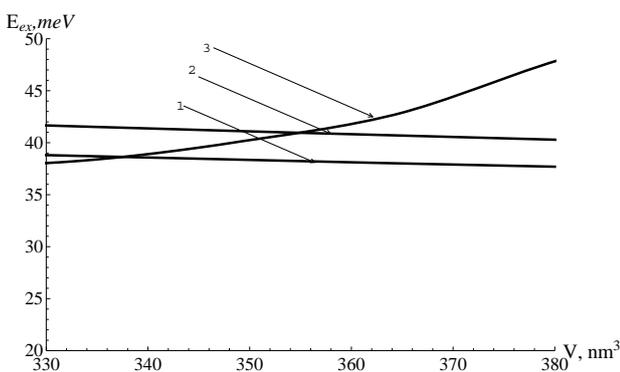


Рис. 4. Залежність енергії зв'язку екситона в двошаровій квантовій точці сфероїдальної форми від об'єму області II.

Як сказано вище, об'єм квантової ями досліджуваної КТ можна змінювати, варіюючи три параметри  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  та  $d$ . Тому одне і теж значення об'єму шару II можна отримати при різних значеннях цих параметрів. На рис. 4. наведено залежності енергії зв'язку основного стану екситона в двошаровій КТ еліпсоїдальної форми. Лінія 1 показує залежність енергії зв'язку екситона від об'єму

шару II при фіксованій фокусній відстані та параметру  $\xi_1$ . Друга лінія (2) демонструє зміну енергії зв'язку екситона від об'єму квантової ями при зміні фокусної відстані, а третя лінія (3) - при зміні параметру  $\xi_1$ . Збільшення об'єму КТ призводить до зменшення середньої відстані між електроном і діркою тому із збільшенням зовнішнього шару КТ, що досягається зростанням  $\xi_2$  та  $d$ , енергія зв'язку екситона спадає. При зміні об'єму квантової ями від 330 до 380  $\text{nm}^3$  енергія зв'язку екситона змінюється від 38 до 48 меВ. Залежності від фокусної відстані та параметру, що визначає величину зовнішнього шару мають однаковий характер, а різниця між ними складає 2.5 меВ. Збільшення розмірів внутрішнього шару веде до збільшення енергії зв'язку екситона, оскільки середня відстань між електроном і діркою зростає. Внаслідок чого при об'ємі 338  $\text{nm}^3$  перетинає криву, залежності енергії зв'язку екситона при зміні фокусної відстані, а при 355  $\text{nm}^3$  - лінію, при зміні параметру  $\xi_2$ .

### Висновки

Отже, в даній роботі досліджено електронні, діркові та екситонні стани в складній двошаровій КТ *glass/CdSe/glass* сфероїдальної форми. Обчислено діркові стани для гетероструктури. Вивчено генезис шести найнижчих станів, при зміні параметрів  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  та  $d$ , які задають величину та форму обох меж поділу середовищ складної КТ. Розрахунки показали, що із збільшенням об'єму другого шару КТ, за що відповідають параметри  $\xi_2$  та  $d$ , енергія станів електрона (дірки) монотонно зменшуються, а енергетичні відстані між рівнями з однаковим  $n$  збільшуються із зменшенням об'єму зовнішнього нанокристалу. Також в роботі обчислено енергію зв'язку основного стану екситона. Показано, вплив на неї параметрів  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  та фокусної відстані.

### Бібліографія

- [1] Kastner M.A. Artificial Atoms // Phys. Today. — 1993. — **46**, № 1. — P. 24–27.
- [2] Yoffe A.D. Low-dimensional systems: Quantum size effects and electronic properties of semiconductor microcrystallites (zero-dimensional systems) and some quasi-two-dimensional systems // Adv. Phys. — 2002. — **51**, № -2. P. 799-890.
- [3] Blokland J.H., Bozkurt M., Ulloa J.M., and other. Ellipsoidal *InAs* quantum dots observed by cross-sectional scanning tunneling microscopy // Applied Physics Letters. — 2009. — **94**, № 2. — P. 023107-023115.
- [4] Cantele G., Ninno D. and Iadonisi G. // J. Phys.: Condens. Matter. — 2000. **12**. — P. 9019–9036.
- [5] Cantele G., Ninno D. and Iadonisi G. // NanoLetters. — 2001. — **1**, № 3. — P. 121–124.
- [6] Cantele G., Ninno D., and Iadonisi G. Shape effects on the one- and two-electron ground state in ellipsoidal quantum dots // Phys. Rev. B. — 2002. — **64**, № 12 — P. 125325–125334.
- [7] Leon H., Marin J.L., Riera R. Excitonic and electronic states in ellipsoidal and semiellipsoidal quantum dots // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. —2005. — **27**, № 4. — P. 385–396.
- [8] Anjana Bagga, Subhais Ghosh and P.K. Chattopadhyay. Nanotechnology. 2005. **16**. 2726–2730.
- [9] Зегря Г.Г., Костантинов О.В., Матвеевцев А.В. Структура энергетических квантовых уровней в квантовой точке, имеющей форму сплюснутого тела вращения // ФТП. — 2003. — **37**, № 3. — P. 334–338.
- [10] Schooss D., Mews A., Eychmuller A., Weller H. Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment // Phys. Rev. B. — 1994. — **49**, № 24. — P. 17072–17078.

- [11] Mews A., Kadavanich A.V., Banin U., Alivisatos A.P. Structural and spectroscopic investigations of CdS/HgS/CdS quantum-dot quantum wells // *Phys. Rev. B.* — 1996. — **53**, № 20. — P. 13242–13245.
- [12] Ткач Н.В. Электрон-фононное взаимодействие в сферических многослойных наногетероструктурах // *ФТТ.* — 1997. — **39**, /№ 6. — P. 1109–1114.
- [13] Ткач Н.В. Головацкий В.А. Квазистационарные состояния электрона в сферической наногетеросистеме  $\beta - HgS/\beta - CdS/\beta - HgS$  // *ФТТ.* — 1999. — **41**, № 11. — С. 2081–2083.
- [14] Бойчук В.І., Кубай Р.Ю., Білінський І.В. Вплив сил зображень на енергетичний спектр електрона в складному сферичному мікрочисталі  $CdS/\beta - HgS/H_2O$  // *Журн. фіз. дослідж.* — 1999. — **3**, № 2. — С. 187–191.
- [15] Boichuk V.I., Bilynskii I.V., Kubai R.Yu. Energy Spectrum of a Charged Particle Near the Surface of a Complex Spherical Heterostructure in View of Noninertial Polarization // *Ukr. J. Phys.* — 2000. — **45**, № 2. — P. 236–241.
- [16] Le-Wei Li, Xiao-Kang Kang, Mook-Seng Leong. *Spheroidal Wave Functions in Electromagnetic Theory.* — New York. — 2002. — 296 p.